

Для учета матричных помех использовали альфа-коррекцию. Так, например, при определении вольфрама ввели поправку на Fe, Al и Mo; молибдена и кремния – Fe, W; марганца и меди – Al, Fe. Это позволило получить минимальное стандартное отклонение результата количественного анализа для каждого анализируемого элемента: W 0.44, Mo 0.068, Mn 0.0032, Cu 0.0035 и Si 0.017 мас.%. Были получены градуировочные графики для элементов в исследуемом диапазоне.

Таким образом, была проведена оптимизация операционных параметров, найдены оптимальные условия возбуждения и регистрации спектров, разработана методика рентгено-флуоресцентного определения вольфрама, молибдена, марганца, меди и кремния в ферровольфраме.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Президиума РАН. №12-Р 3-1004.

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОТЕРМИЧЕСКОГО АТОМНО-АБСОРБЦИОННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ФТОРА ПО МОЛЕКУЛЯРНОМУ ПОГЛОЩЕНИЮ SrF

Зайцева П.В.^{*}, Курмачев Ю.А., Пупышев А.А.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: zaitcevapolina@gmail.com

Одновременно с разработкой экспрессных методик молекулярно-абсорбционного определения фтора в различных объектах анализа с использованием атомно-абсорбционных спектрометров высокого разрешения с непрерывным источником спектра (HR CS AAS) возникла потребность изучения механизма образования его двухатомных молекул MeF. Знание этого механизма необходимо для проведения градуировки, учета и устранения матричных помех, улучшения метрологических показателей анализа. Первые исследования механизма образования молекул SrF, выполненные только экспериментально [1], показали малоинформативность и неоднозначность получаемой информации.

Термодинамическое моделирование термохимических процессов стадии высушивания пробы, стадий пиролиза и испарения при внесении растворов $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ и NaF на платформу графитовой печи выполнено с использованием программного комплекса HSC 6.1 с собственным банком термодинамических данных. Условия моделирования соответствовали экспериментальным данным [1]. Расчеты показали, что в случае совместного внесения $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ и NaF на один участок платформы уже на стадии высушивания пробы возможно протекание обменной реакции с образованием конденсированного SrF_2^c . На стадии пиролиза в зоне поверхности пробы прогнозируются потери фтора в газовую

фазу в виде NaF^g в диапазоне температур 800-1000 °C, а значимые – выше 1250 °C в виде SrF^g и SrF_2^g . Согласно расчетам при низких температурах стадии атомизации происходит неполное разложение SrF_2^c до SrF^g , а полное разложение – при температуре выше 1600-1650 °C. Наблюдается расхождение в экспериментальных температурах стадии атомизации, полученной в работе [1] (2200 °C) и нами (1850-1900 °C). Прогнозируется, что NaF не является оптимальным веществом для градуировки по фтору, в этом случае лучше использовать NH_4F .

При раздельном внесении растворов $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$ и NaF на разные участки платформы на стадии высушивания раствора NaF образуется NaF^c , который на стадии пиролиза, как в зоне поверхности пробы, так и в зоне контакта пробы с углеродом атомизатора начинает разлагаться до газообразных NaF^g и Na_2F_2^g , что будет определять температуры стадии пиролиза. В данном случае образование газообразной молекулы SrF^g будет происходить в газовой фазе аналитической зоны графитовой печи на стадии испарения.

Термодинамическое моделирование влияние галлия на эффективность образования SrF показало, что присутствие галлия в аналитической зоне графитовой печи в количествах близких и превышающих Sr приводит к существенному снижению молекулярного поглощения SrF , что согласуется с экспериментальными данными [1].

В результате исследований на примере молекул SrF^g разработан алгоритм теоретического изучения механизма образования двухатомных молекул в графитовой печи, который можно применять для изучения механизмов образования других молекул MeF , а также двухатомных молекул Cl , Br , J , P и S , с целью последующей оптимизации определения данных элементов методом молекулярно-абсорбционного анализа.

Работа выполнена при финансовой поддержке УрФУ в рамках реализации Программы развития УрФУ для победителей конкурса «Молодые ученые УрФУ».

1. Ozbek N., Akman S., Analytical Sciences, 29, 741 (2013)

МЕТОДИКА ГРАДУИРОВКИ ЭПР ДОЗИМЕТРА

Киряков А.Н.^{*}, Звонарев С.В., Кортон В.С.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: Seni-i@yandex.ru

Контроль доз излучений необходим при работе с использованием ионизирующих излучений. Особенно остро в настоящее время стоит задача измерения высоких доз излучений (более 10 Гр). Данный диапазон излучений используется в радиационных технологиях, ядерной технике и других отраслях промыш-